

ЭНЕРГЕТИЧЕСКИЙ СПЕКТР УЗКОЗОННЫХ ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ ГЕТЕРОСТРУКТУР, ОПИСЫВАЕМЫХ ДВУЗОННЫМ УРАВНЕНИЕМ

А.В.Колесников*¹⁾ А.П.Силин

Физический институт им.П.Н.Лебедева РАН
117924 Москва, Россия

*Институт теоретической физики им. Л.Д.Ландау РАН
117940 Москва, Россия

Поступила в редакцию 21 марта 1995 г.

Рассмотрены два эффекта, возникающие в узкощелевых гетероструктурах, описываемых двузонным уравнением. Первый эффект обуславливает отсутствие совпадающих значений энергий размерного квантования в дырочной и электронной ямах в гетероструктурах II типа, симметричных относительно замены $E_c(z) = -E_v(-z)$, где $E_c(z)$ ($E_v(z)$) – энергетическое положение дна (потолока) зоны проводимости (валентной зоны). Второй эффект состоит в наличии локализованного состояния, энергия которого совпадает с точкой инверсии в полупроводниковой структуре с взаимно инвертированными зонами. Это состояние не зависит от формы энергетической структуры и граничных условий.

1. Для расчета гетероструктур II типа, в которых потолок валентной зоны одного полупроводника (например, GaSb) находится по энергии выше, чем дно зоны проводимости другого (например, InAs) [1], однозонное приближение метода эффективной массы неприменимо [2]. Это связано с тем, что глубина потенциальной ямы для электронов и дырок превосходит ширину энергетической щели полупроводников, из которых составлена решетка. Необходимо использовать гамильтониан, учитывающий взаимодействие валентной зоны и зоны проводимости [3]. Мы будем использовать двузонный гамильтониан в форме, приведенной в работе [4].

$$\begin{bmatrix} \varepsilon_g(z)/2 + \varphi(z) & Pk_{\perp} - P\partial_z \\ Pk_{\perp} + P\partial_z & -\varepsilon_g(z)/2 + \varphi(z) \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \psi \\ \chi \end{Bmatrix} = \varepsilon \begin{Bmatrix} \psi \\ \chi \end{Bmatrix}. \quad (1)$$

Здесь $\varepsilon_g(z)$ – энергетическая щель полупроводника, $\varphi(z)$ определяет ее положение, $\hbar = 1$, $k_{\perp} = \sqrt{k_x^2 + k_y^2}$ – импульс свободного движения в плоскости слоев гетероструктуры, матричный элемент P – эффективная скорость, а ψ и χ – огибающие волновые функции, относящиеся к двум взаимодействующим зонам.

Если ввести $E_v(z) = \varphi(z) - \varepsilon_g(z)/2$; $E_c(z) = \varphi(z) + \varepsilon_g(z)/2$, то нетрудно получить уравнения типа уравнений Шредингера:

$$\begin{cases} \psi'' - \psi' \frac{P^2 E'_v}{E_v - \varepsilon} + \psi [(E_v - \varepsilon)(E_c - \varepsilon) - \frac{k_{\perp} P E'_v}{E_v - \varepsilon} - P^2 k_{\perp}^2] = 0, \\ \chi'' - \chi' \frac{P^2 E'_c}{E_c - \varepsilon} + \chi [(E_v - \varepsilon)(E_c - \varepsilon) + \frac{k_{\perp} P E'_c}{E_c - \varepsilon} - P^2 k_{\perp}^2] = 0. \end{cases} \quad (2)$$

2. Хорошо известным фактом, подтвержденным многочисленными экспериментальными и теоретическими работами [1, 5–8], является существование в гетероструктурах II типа перехода полупроводник–полуметалл при изменении толщины слоев. Однако численные расчеты [9,10] указали на то, что при

¹⁾ e-mail: alkol@itp.ac.ru

увеличении толщины слоев нижняя подзона проводимости опускалась без пересечения ниже верхней валентной подзоны.

Нами в [11] была предпринята попытка выяснить аналитически ситуацию для модельной гетероструктуры, потенциал в которой записывается в виде ($u_1 > u_2$)

$$\left\{ \begin{array}{ll} E_c = u_1 & 0 < z, \quad d_1 < z < d_1 + d_2, \quad 2d_1 + d_2 < z \quad (\text{GaAs}), \\ E_v = -u_1, & \\ E_c = -u_2 & 0 < z < d_1 \quad (\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}), \\ E_v = -u_1, & \\ E_c = u_1 & d_1 + d_2 < z < 2d_1 + d_2 \quad (\text{GaSb}_y\text{As}_{1-y}). \\ E_v = u_2, & \end{array} \right. \quad (3)$$

Спектр системы определяется из уравнения

$$e^{2k_1 d_2} \text{tg}(k_2 d_1) \text{tg}(k_3 d_1) (1 + A^2)(1 + B^2) + \\ + \{(A^2 - 1) \text{tg}(k_2 d_1) - 2A\} \{(1 - B^2) \text{tg}(k_3 d_1) - 2B\} = 0, \quad (4)$$

где

$$k_1 = \frac{1}{P} \sqrt{(u_1 - \epsilon)(u_1 + \epsilon) + P^2 k_{\perp}^2}, \quad k_2 = \frac{1}{P} \sqrt{(u_1 + \epsilon)(u_2 + \epsilon) - P^2 k_{\perp}^2}, \\ k_3 = \frac{1}{P} \sqrt{(u_1 - \epsilon)(u_2 - \epsilon) - P^2 k_{\perp}^2}, \quad A^2 = \frac{\epsilon + u_2}{u_1 - \epsilon}, \quad B^2 = \frac{u_1 + \epsilon}{u_2 - \epsilon}.$$

Далее положим $k_{\perp} = 0$, что не изменит физическую картину. Легко видеть, что уравнение (4) не меняется при замене $\epsilon \rightarrow -\epsilon$ (что естественно из-за симметрии системы) и что $\epsilon = 0$ не является корнем ни при каких значениях параметров. На рис.1 приведена зависимость энергии от ширины ямы d_1 для значений параметров $u_1 = 3/P^2$, $u_2 = 1/P^2$, $d_2 = 1/P$. Для $\epsilon > 0$ видно, что имеются два типа уровней - "опускающиеся" и "поднимающиеся" с ростом d_1 . Очевидно, что опускающиеся уровни - это уровни, возникающие при размерном квантовании электронов, а поднимающиеся - дырок. Причем эти уровни не пересекаются, а расталкиваются. При этом, если проследить за волновыми функциями, можно обнаружить, что соответствующие опускающимся уровням волновые функции локализованы в электронной яме, а поднимающимся - в дырочной. То есть переход полупроводник-полуметалл действительно имеется в согласии с [1,8], но он происходит отмеченным в [9,10], образом.

При устремлении расстояния d_2 между ямами к нулю и периодическом повторении получившейся структуры (то есть образовании сверхрешетки типа InAs-GaSb [1]) минимальное значение $|\epsilon|$ периодически обращается в нуль при изменении толщины слоев, в полном соответствии с [4].

Ниже мы обобщим результаты, полученные для гетероструктуры вида (3) на более широкий класс гетероструктур, в которых $E_v(z) = -E_c(-z)$, то есть яма для дырок совпадает по форме с ямой для электронов. Отсутствие состояния с $\epsilon = 0$ соответствует расщеплению энергии в двух идентичных ямах.

Действительно, прежде всего отметим, что при замене $\epsilon \rightarrow -\epsilon$, $E_c(-z) \rightarrow -E_v(z)$, $z \rightarrow -z$, $\chi(z) \rightarrow -i\psi(-z)$, $\psi(z) \rightarrow i\chi(-z)$ система (1) не изменится. Значит, если мы знаем решения для уравнения (2) для области $z > 0$

$$\left\{ \begin{array}{l} \Psi(z, \epsilon) = A\psi_1(z, \epsilon) + iB\psi_2(z, \epsilon), \\ \Phi(z, \epsilon) = C\chi_1(z, \epsilon) + iD\chi_2(z, \epsilon), \end{array} \right. \quad (5)$$

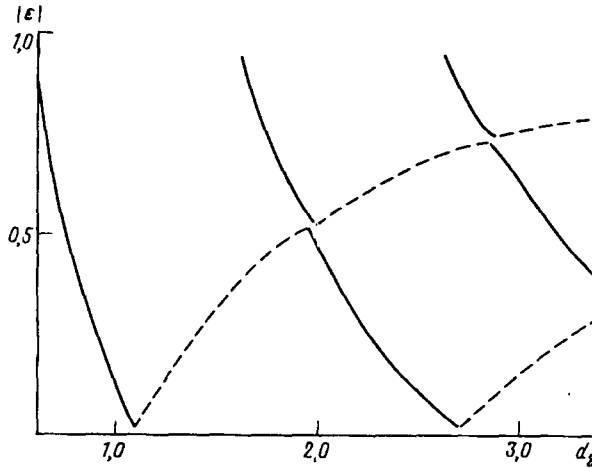


Рис.1

где ψ_1, ψ_2 — независимые решения уравнений (2), а функции $\chi_1(\chi_2)$ получены из (1) с $\psi = \psi_1(\psi_2)$. Тогда мы можем сразу записать решения для области $z < 0$:

$$\begin{cases} \Psi(z, \varepsilon) = iC\chi_1(-z, -\varepsilon) - D\chi_2(-z, -\varepsilon), \\ \Phi(z, \varepsilon) = -iA\psi_1(-z, -\varepsilon) + B\psi_2(-z, -\varepsilon). \end{cases} \quad (6)$$

Поскольку нас интересует лишь наличие или отсутствие состояния с $\varepsilon = 0$, прямо в (5), (6) положим $\varepsilon = 0$. Эта операция не совсем корректна с математической точки зрения (следовало бы получить уравнение для нахождения спектра и из него определить, присутствует ли состояние с $\varepsilon = 0$ для каких-нибудь значений параметров), однако она может быть оправдана непрерывностью зависимости получаемого из (5), (6) уравнения квантования ε , если только точка $\varepsilon = 0$ не является особой точкой дифференциальных уравнений (2). Обсуждение этого случая откладывается до разд. 3.

Если теперь наложить на решения в качестве граничных условий обращение Ψ, Φ в нуль на $\pm\infty$, что соответствует тому, что частицы локализованы, то решениями ψ_1, χ_1 являются затухающие на $\pm\infty$ функции (для определенности константы B, D при возрастающих функциях необходимо положить равными нулю). Но уравнение (2) — действительное уравнение, и нельзя "сшить" действительные при $z > 0$ и мнимые при $z < 0$ решения в точке $z = 0$, если только ψ_1, χ_1 не обращаются одновременно в нуль в этой точке.

Таким образом, нам осталось только лишь выяснить ту форму $E_v(z)$ и $E_c(z)$, которая не обращала бы ψ_1, χ_1 в нуль при $z = 0$. Если подставить в (2) $\psi = \sigma\sqrt{E_v}$, $\phi = \rho\sqrt{E_c}$, то для σ и ρ можно получить уравнения

$$\begin{cases} \sigma'' + \sigma(E_v E_c - P^2(k_{\perp} + E'_v/2E_v)^2 - P^2 E''_v/2E_v - P^2 E'^2_v/E_v^2) = 0, \\ \rho'' + \rho(E_v E_c - P^2(k_{\perp} - E'_c/2E_c)^2 - P^2 E''_c/2E_c - P^2 E'^2_c/E_c^2) = 0. \end{cases} \quad (7)$$

Теперь, так как в окрестности точки $z = 0$ $E_c E_v < 0$, для данной общей ситуации мы будем иметь тот же самый вид волновых функций, который был и для рассмотренного выше случая (3), если принять, что $E_c \sim z^\alpha + \text{const}$ в области $z \sim 0$, $0 \leq \alpha \leq 1$.

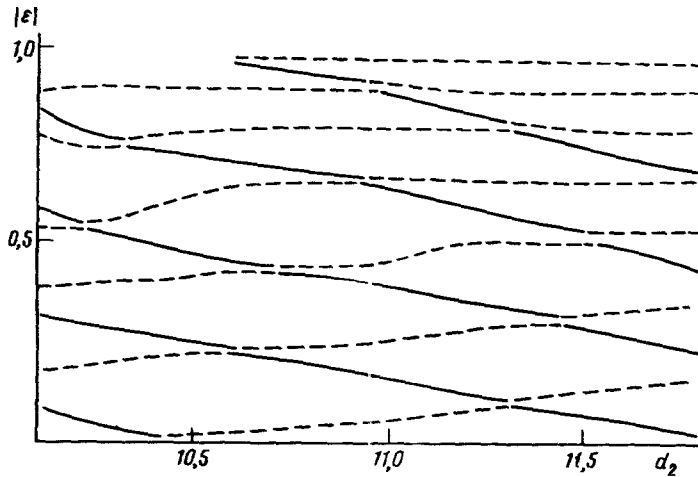


Рис. 2.

Необходимо отметить, что именно условие $\Psi(\pm\infty) \rightarrow 0$, $\Phi(\pm\infty) \rightarrow 0$ позволило выбрать $\psi_{1,2}$, $\chi_{1,2}$ вещественными. Для рассмотренной в [4] сверхрешетки решениями являются блоховские функции, не убывающие на $\pm\infty$, и $\psi_{1,2}$, $\chi_{1,2}$ нельзя выбрать вещественными.

3. Теперь рассмотрим пространственно-неоднородный контакт двух полупроводников с взаимно инвертированными зонами. Впервые структура подобного рода с бесконечным размером была рассмотрена в [12]. Для таких систем в работах [12,13] при $E_v(z) = -\alpha^2 E_c(z)$ было показано, что имеется локализованное вблизи точки инверсии состояние с энергией, совпадающей с точкой инверсии. Этот результат был получен преобразованием двузонных уравнений к суперсимметричным. Однако для произвольных E_c , E_v , образующих инвертированный контакт, примененный в [13] метод не работает, так как естественный претендент на роль суперпотенциала $W^2 = E_c E_v$ им не является. Более того, можно убедиться, что случай $E_v(z) = -\alpha^2 E_c(z)$ является единственным, для которого двузонные уравнения могут быть преобразованы к суперсимметричным.

Однако если энергетическая щель полупроводника (не важно конечного или бесконечного размера, важно лишь наличие одной точки инверсии) является непрерывной функцией координаты z , меняющей знак в точке инверсии, результат [12,13] остается справедливым. Докажем, что существование состояния с $\epsilon = 0$ обусловлено лишь самим фактом пересечения зон. (Начало координат совпадает с точкой инверсии.)

Если предположить, что в окрестности нуля ($z \sim 0$) энергетические зоны ведут себя как $E_c \sim z^\alpha$ и $E_v \sim z^\beta$, обращаясь в ноль в точке $z = 0$, с некоторыми показателями α и β , которые, вообще говоря, могут отличаться друг от друга для z , больших и меньших нуля, то решения уравнения (2) в окрестности нуля запишутся в виде

$$\begin{cases} \Psi \sim z^{1+\alpha} A_1 + A_2, \\ \Phi \sim z^{1+\beta} A_3 + A_4, \end{cases} \quad (8)$$

где A_i — константы. Общие решения уравнений (2) для областей $z > 0$ и $z < 0$ будут иметь вид

$$\begin{cases} \Psi = Cy_1(z) + C_1y_2(z), \\ \Phi = Dg_1(z) + D_1g_2(z); \end{cases} \quad (9)$$

$$\begin{cases} \Psi = Cy'_1(z) + C_2y'_2(z), \\ \Phi = Dg'_1(z) + D_2g'_2(z), \end{cases} \quad (10)$$

где C, D, C_i, D_i – константы, а функции $y_2(g_2), y'_2(g'_2)$ ведут себя как $z^{1+\alpha}, z^{1+\beta}$ при $z \sim 0$; функции же $y_1(g_1), y'_1(g'_1)$ при $z \sim 0$ асимптотически не зависят от z и совпадают. Снова $y_1^{(i)} (y_2^{(i)})$ – частное решение уравнения (2), а $g_1^{(i)} (g_2^{(i)})$ получено из функции $y_1 (y_2)$, подставленной вместо ψ в (1).

Описанным выше выбором решений и констант мы обеспечили непрерывность решений в точке инверсии ($z = 0$), и в запасе у нас осталось достаточно констант, чтобы удовлетворить произвольным граничным условиям.

Заметим, что именно наличие сингулярной точки в (2), возникающей в результате пересечения зон, позволило нам выбрать разные константы C_i и D_i в решениях (9) и (10). Укажем также на то, что точек инверсии в образце бесконечного размера (то есть сингулярных точек в уравнениях (2), в котором координата z принимает значения на всей числовой прямой) должно быть нечетное число, в противном случае нельзя обеспечить затухание решений (2) на $\pm\infty$ одновременно. Ситуация подобного рода с двумя точками инверсии была рассмотрена в [14,15], где, естественно, состояние с $\epsilon = 0$ отсутствовало.

Выражаем признательность М.Алтарелли и Б.А.Волкову за обсуждение результатов работы. Настоящая работа частично поддержана грантами Международного научного фонда N9Z000, Российским фондом фундаментальных исследований (грант 93-02-14700) и стипендией им.Л.Д.Ландау, предоставленной KFA Forschungszentrum Jülig GmbH.

-
1. L.Esaki, Lect. Notes Phys. **133**, 302 (1980).
 2. А.П.Силин, Кр. Сообщ. Физ. ФИАН **12**, 13 (1985).
 3. Л.В.Келдыш, ЖЭТФ **45**, 364 (1963).
 4. M. de Dios Leyva, R.P.Alvarez, and J.L.Gondar, Phys. Stat. Sol. (b) **125**, 221 (1984)
 5. G.A.Sai-Halasz, R.Tsu, and L.Esaki, Appl. Phys. Lett. **30**, 651 (1977).
 6. G.A.Sai-Halasz, L.Esaki, and W.A.Harrison, Phys. Rev. **B18**, 2812 (1978).
 7. L.L. Chang, N.Kawai, G.A.Sai-Halasz et al., Appl. Phys. Lett. **35**, 939 (1979).
 8. G.Bastard, E.E.Mendez, L.L.Chang and L.Esaki, J. Sci. Technol. **21**, 531 (1982).
 9. M.Altarelli, Lect. Notes Phys. **177**, 174 (1983).
 10. M.Altarelli, Phys. Rev. **B28**, 842 (1983).
 11. А.В.Колесников, А.П.Силин, Препринт No. 21 ФИАН, 1993.
 12. О.А.Панкратов, Б.А.Волков, Письма в ЖЭТФ **42**, 145 (1985).
 13. O.A.Pankratov, S.V.Pakhomov, and B.A.Volkov, Solid State Comm. **61**, 93 (1987).
 14. Б.Г.Идиш, М.Ш.Усманов, Физ. Техн. Полупр. **26**, 329 (1992).
 15. V.Korenann and H.D.Drew, Phys. Rev. **B 25**, 6446 (1986).